

BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN

Telah dilakukan penelitian mengenai Perhitungan Sifat Elektronik LiBX_3 (B = Pb dan Sn; X = Br, Cl dan I) Fase Kubik Dengan Metode *Density Functional Theory*. Perhitungan yang digunakan dalam penelitian ini menggunakan jenis *pseudopotensial* yang digunakan adalah *Semi Local Norm Conserving* dengan *Generalized Gradient Approximation Perdew Burke Enzerhof exchange correlation functional* (GGA-PBE).

4.1 Variasi Parameter Perhitungan

Adapun variasi parameter perhitungan yang dilakukan untuk *Perovskite* Elektronik LiBX_3 (B = Pb dan Sn; X = Br, Cl dan I) Fase Kubik Dengan Metode *density functional theory* adalah sebagai berikut:

4.1.1 Energi *Cut-off*

Pengaturan energi *cut-off* merupakan langkah krusial dalam perhitungan berbasis teori fungsional kerapatan (DFT) menggunakan *Quantum ESPRESSO*. Semakin besar grid akan membuat perhitungan semakin teliti namun waktu yang diperlukan pun semakin lama. Dalam perhitungan ini akan menggunakan energi *cut-off* mulai dari 10Ry hingga 150Ry sedangkan energi *cut-rho* merupakan *charge density* dan potensial sementara untuk nilainya adalah nilai energi *cut-off* × 8 (Suprayoga dkk., 2021). Berikut adalah tabel untuk hasil perhitungan energi *cut-off* LiPbBr_3 , LiPbCl_3 , LiPbI_3 , LiSnBr_3 , LiSnCl_3 , dan LiSnI_3 .

Tabel 4.1 Hasil Perhitungan Energi *Cut-off* LiPbBr_3 , LiPbCl_3 , LiPbI_3 , LiSnBr_3 , LiSnCl_3 , dan LiSnI_3

<i>Perovskite</i>	Ecutwfc	ecutrho	Etot	t
	(Ry)	(Ry)	(Ry)	
	10	80	-215,27009089	3,44s
	20	160	-230,08879959	19,38s
	30	240	-231,56862244	44,99s
	40	320	-231,62445515	50,97s

	50	400	-231,63643360	3m19,06s
	60	480	-231,63756816	4m18,50s
LiPbBr ₃	70	560	-231,63867608	4m35,30s
	80	640	-231,63948663	3m39,52s
	90	720	-231,63984744	4m14,57s
	100	800	-231,63946889	5m12,27s
	110	880	-231,63985378	6m54,65s
	120	960	-231,63985470	9m
	130	1.040	-231,63987253	9m31,07s
	140	1.120	-231,63947487	13m
	150	1.200	-231,63987253	6m50,39s
	10	80	-224,79914065	3,06s
	20	160	-239,60613637	11,67s
	30	240	-241,12051092	27,72s
	40	320	-241,17729469	41,82s
	50	400	-241,19353315	1m14,48s
	60	480	-241,19915513	1m11,01s
LiPbCl ₃	70	560	-241,20008066	1m49,33s
	80	640	-241,20042086	1m53,66s
	90	720	-241,20097782	2m
	100	800	-241,20138190	3m29,98s
	110	880	-241,20147331	3m13,06s
	120	960	-241,20145312	4m
	130	1.040	-241,20144517	3m30,18s
	140	1.120	-241,20146267	4m45,71s
	150	1.200	-241,20148832	6m
	10	80	-203,62701852	3,48s
	20	160	-217,79524917	15,69s
	30	240	-219,30867364	28,93s
	40	320	-219,35647746	38,10s
	50	400	-219,35948603	46,09s
	60	480	-219,36137928	1m
LiPbI ₃	70	560	-219,36172765	1m35,03s
	80	640	-219,36184572	1m53,39s
	90	720	-219,36193941	1m56,17s
	100	800	-219,36195482	2m29,63s
	110	880	-219,36192713	3m11,37s
	120	960	-219,36191112	4m59,73s
	130	1.040	-219,36190746	4m36,93s
	140	1.120	-219,36190817	5m16,17s
	150	1.200	-219,36191162	5m
	10	80	-87,56921177	1,65s
	20	160	-88,35161052	14,20s
	30	240	-88,39042085	22,36s
	40	320	-88,40750459	42,94s
	50	400	-88,41846984	54,96s

LiSnBr ₃	60	480	-88,42002512	1m	
	70	560	-88,42069225	2m	
	80	640	-88,42145918	2m51,36s	
	90	720	-88,42175881	2m49,87s	
	100	800	-88,42179595	3m	
	110	880	-88,42181548	6m26,49s	
	120	960	-88,42185500	4m12,04s	
	130	1.040	-88,42188305	4m11,94s	
	140	1.120	-88,42189220	6m16,21s	
	150	1.200	-88,42189293	5m20,85s	
	LiSnCl ₃	10	80	-97,05270794	1,87s
		20	160	-97,81719234	9,62s
		30	240	-97,89211918	16,02s
		40	320	-97,91006041	26,50s
		50	400	-97,92500100	38,14s
60		480	-97,93105558	44,51s	
70		560	-97,93218177	1m10,77s	
80		640	-97,93248290	1m17,03s	
90		720	-97,93295406	1m36,95s	
100		800	-97,93335315	1m54,21s	
110		880	-97,93352742	2m	
120		960	-97,93356294	2m39,95s	
130		1.040	-97,93356982	2m41,47s	
140		1.120	-97,93358627	2m40,64s	
150		1.200	-97,93360418	2m52,13s	
LiSnI ₃	10	80	-75,74485127	1,66s	
	20	160	-76,16640807	6,41s	
	30	240	-76,22070150	11,00s	
	40	320	-76,23036872	25,10s	
	50	400	-76,23225516	29,59s	
	60	480	-76,23344792	37,69s	
	70	560	-76,23362971	44,05s	
	80	640	-76,23370012	53,27s	
	90	720	-76,23376165	1m	
	100	800	-76,23377449	1,66s	
	110	880	-76,23377747	1m5,40s	
	120	960	-76,23378222	1m20,22s	
	130	1.040	-76,23378390	1m24,95s	
	140	1.120	-76,23378419	1m27,99s	
	150	1.200	-76,23378466	1m43,37s	

Maka dapat dilihat dari tabel diatas energi *cut-off* yang dapat digunakankan untuk LiPbBr_3 90 Ry dengan energi *cut-rho* 720 Ry, untuk LiPbCl_3 110 Ry dengan energi *cut-rho* 880 Ry, untuk LiPbI_3 90 Ry dengan energi *cut-rho* 720 Ry, untuk LiSnBr_3 80 Ry dengan energi *cut-rho* 640 Ry, untuk LiSnCl_3 110 Ry dengan energi *cut-rho* 880 Ry dan untuk LiSnI_3 60 Ry dengan energi *cut-rho* 480 Ry. Pemilihan energi *cut-off* untuk *perovskite* LiPbCl_3 , LiPbI_3 , LiSnCl_3 , dan LiSnI_3 mengacu kenilai energi totalnya yang sudah presisi 4 angka dibelakang koma. Sedangkan untuk *perovskite* LiPbBr_3 dan LiSnBr_3 dipilih berdasarkan nilai energi totalnya yang sudah presisi 3 angka dibelakang koma. Presisi 4 angka dibelakang koma tidak dipilih karena semakin lama waktu perhitungan yang akan dilakukan. Seperti yang diketahui bahwasanya semakin besar nilai energi *cut-off* akan membuat perhitungan semakin teliti namun waktu yang diperlukan pun semakin lama (Shanaz, 2019).

4.1.2 K-Point

Perhitungan *k-point* adalah untuk menyampel Ruang Brillouin, yang mewakili semua kemungkinan momentum elektron dalam kristal. Pemilihan grid *k-point* yang baik dan cukup padat meningkatkan akurasi energi total, band structure, dan *density of states* (DOS) sambil menyeimbangkan efisiensi komputasi. Grid *k-point* yang optimal memastikan hasil perhitungan konvergen dan tidak berubah signifikan dengan peningkatan jumlah *k-point*. Selain itu, *k-point* mempengaruhi deskripsi interaksi elektron dalam material, yang penting untuk memahami sifat elektronik, optik, dan transportasi. Oleh karena itu, perhitungan *k-point* sangat penting untuk mendapatkan gambaran yang akurat dan efisien dari sifat-sifat elektronik suatu material. Dalam perhitungan ini akan menggunakan *k-point* mulai dari $1 \times 1 \times 1$ hingga $10 \times 10 \times 10$ dengan shift 0 0 0. Berikut adalah tabel untuk hasil perhitungan *k-point* LiPbBr_3 , LiPbCl_3 , LiPbI_3 , LiSnBr_3 , LiSnCl_3 , dan LiSnI_3 .

Tabel 4.2 Hasil Perhitungan *k-point* LiPbBr_3 , LiPbCl_3 , LiPbI_3 , LiSnBr_3 , LiSnCl_3 , dan LiSnI_3

<i>Perovskite</i>	<i>K-point</i>	Etot	t
		(Ry)	
	$1 \times 1 \times 1$	-232,08615901	46,37s
	$2 \times 2 \times 2$	-231,52297054	1m16,42s
	$3 \times 3 \times 3$	-231,69021300	1m21,81s

LiPbBr ₃	4×4×4	-231,63975092	3m52,64s
	5×5×5	-231,66245960	2m26,98s
	6×6×6	-231,65384130	4m18,97s
	7×7×7	-231,65787524	4m52,18s
	8×8×8	-231,65577626	9m34,50s
	9×9×9	-231,65693787	8m31,85s
	10×10×10	-231,65631430	15m5,18s
	1×1×1	-241,61752612	45,06s
	2×2×2	-241,11352551	1m57,57s
	3×3×3	-241,22819509	1m22,09s
LiPbCl ₃	4×4×4	-241,20139474	4m
	5×5×5	-241,21105358	2m57,41s
	6×6×6	-241,20742808	5m31,22s
	7×7×7	-241,20896480	4m59,78s
	8×8×8	-241,20826613	8m35,78s
	9×9×9	-241,20857972	8m17,00s
	10×10×10	-241,20841864	13m58,53s
	1×1×1	-219,75700020	21,39s
	2×2×2	-219,18253365	1m31,67s
	3×3×3	-219,43719318	50,12s
LiPbI ₃	4×4×4	-219,36188915	2m20,72s
	5×5×5	-219,39887968	2m
	6×6×6	-219,38034192	5m26,28s
	7×7×7	-219,39147336	3m45,89s
	8×8×8	-219,38460794	11m
	9×9×9	-219,38955629	6m23,05s
	10×10×10	-219,38655980	14m27,14s
	1×1×1	-88,73668755	22,34s
	2×2×2	-88,30626859	40,80s
	3×3×3	-88,46975638	34,91s
LiSnBr ₃	4×4×4	-88,42145690	2m57,17s
	5×5×5	-88,44473706	1m16,52s
	6×6×6	-88,43425750	2m15,55s
	7×7×7	-88,44013329	3m12,52s
	8×8×8	-88,43715768	3m55,02s
	9×9×9	-88,43899067	5m23,65s
	10×10×10	-88,43786344	11m24,19s
	1×1×1	-98,25359758	16,59s
	2×2×2	-97,85228776	1m27,04s
	3×3×3	-97,96211363	31,12s
LiSnCl ₃	4×4×4	-97,93352437	2m
	5×5×5	-97,94544889	1m10,27s
	6×6×6	-97,94053060	3m
	7×7×7	-97,94304386	2m24,79s
	8×8×8	-97,94178456	5m57,95s
	9×9×9	-97,94250680	3m52,60s
	10×10×10	-97,94207719	5m37,34s
	1×1×1	-76,47002361	8,82s

	2×2×2	-76,09398705	16,43s
	3×3×3	-76,29678780	16,50s
	4×4×4	-76,23344533	31,66s
LiSnI ₃	5×5×5	-76,26503114	38,65s
	6×6×6	-76,24786498	1m38,07s
	7×7×7	-76,25860532	1m
	8×8×8	-76,25176169	3m24,11s
	9×9×9	-76,25680673	1m50,94s
	10×10×10	-76,25379075	2m44,67s

Maka dapat dilihat dari tabel diatas *k-point* yang dapat digunakankan untuk LiPbBr₃ adalah *k-point* 7×7×7, untuk LiPbCl₃ adalah *k-point* 7×7×7, untuk LiPbI₃ adalah *k-point* 9×9×9, untuk LiSnBr₃ adalah *k-point* 8×8×8, untuk LiSnCl₃ adalah *k-point* 9×9×9, dan untuk LiSnI₃ adalah *k-point* 7×7×7. Pemilihan nilai *k-point* untuk *provskite* LiPbCl₃ dan LiSnCl₃ mengacu ke energi total yang sudah presisi 3 angka dibelakang koma. Sedangkan untuk *perovskite* LiPbBr₃, LiPbI₃, LiSnBr₃, dan LiSnI₃ mengacu ke energi total yang sudah presisi 2 angka dibelakang koma atau waktu yang masih mempunyai untuk perhitungan selanjutnya. Seperti yang diketahui bahwasanya semakin besar nilai *k-point* akan membuat perhitungan semakin teliti namun waktu yang diperlukan pun semakin lama (Shanaz, 2019).

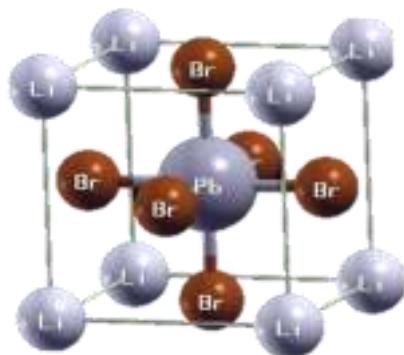
4.1.3 *Vc-Relax*

Penentuan konstanta kisi optimum dicapai dengan mengamati hasil yang menunjukkan nilai konvergen dengan energi total minimum. Energi total minimum ini menunjukkan keadaan bahan yang paling stabil. Oleh karena itu, struktur dengan energi total minimum memiliki keadaan paling seimbang. Hasil optimasi parameter kisi ini kemudian digunakan untuk menghitung struktur elektronik material tersebut. Untuk melihat perubahan pada konstanta kisi, file input dan output dari perhitungan dimasukkan ke dalam software XCrysDen. Berikut adalah perubahannya dapat dilihat gambar dibawah ini:

1. LiPbBr₃

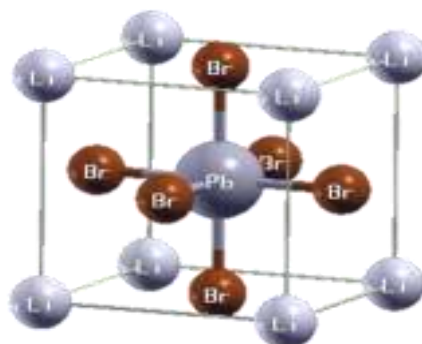
ID	Sym	Atm.Num	X/Angstrom	Y/Angstrom	Z/Angstrom
Selected Atom No.1:	7	Li 3	+0.00000000	+0.00000000	+5.00000000
Selected Atom No.2:	12	Li 3	+5.00000000	+0.00000000	+0.00000000

(a)



ID	Sym	Atm.Num	X/Angstrom	Y/Angstrom	Z/Angstrom
Selected Atom No.1:	7	Li 3	+0.00000000	+0.00000000	+5.93633000
Selected Atom No.2:	12	Li 3	+5.93633000	+0.00000000	+0.00000000

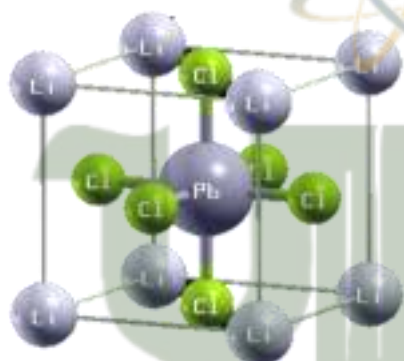
(b)



2. LiPbCl₃

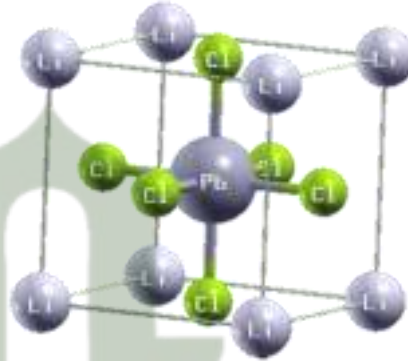
ID	Sym	Atm.Num	X/Angstrom	Y/Angstrom	Z/Angstrom
Selected Atom No.1:	7	Li 3	+0.00000000	+0.00000000	+5.00000000
Selected Atom No.2:	12	Li 3	+5.00000000	+0.00000000	+0.00000000

(a)



ID	Sym	Atm.Num	X/Angstrom	Y/Angstrom	Z/Angstrom
Selected Atom No.1:	7	Li 3	+0.00000000	+0.00000000	+5.662615650
Selected Atom No.2:	12	Li 3	+5.662615650	+0.00000000	+0.00000000

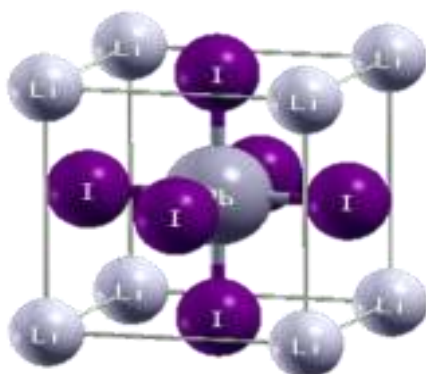
(b)



3. LiPbI₃

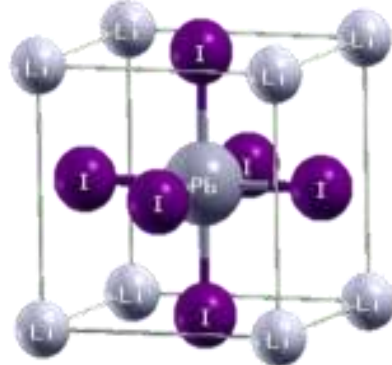
ID	Sym	Atm.Num	X/Angstrom	Y/Angstrom	Z/Angstrom
Selected Atom No.1:	7	Li 3	+0.00000000	+0.00000000	+5.00000000
Selected Atom No.2:	12	Li 3	+5.00000000	+0.00000000	+0.00000000

(a)



ID	Sym	Atm.Num	X/Angstrom	Y/Angstrom	Z/Angstrom
Selected Atom No.1:	7	Li 3	+0.00000000	+0.00000000	+6.318017795
Selected Atom No.2:	12	Li 3	+6.318017795	+0.00000000	+0.00000000

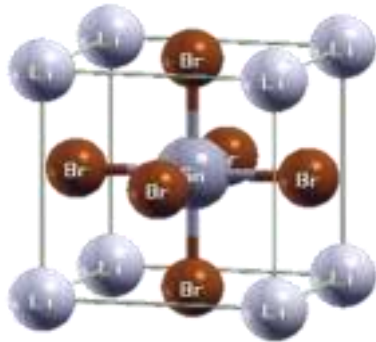
(b)



4. LiSnBr₃

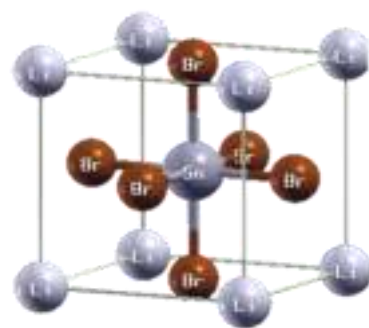
ID	Sym	Atm. Num	X/Angstrom	Y/Angstrom	Z/Angstrom
Selected Atom No.1:	7	Li 3	+0.00000000	+0.00000000	+5.00000000
Selected Atom No.2:	12	Li 3	+5.00000000	+0.00000000	+0.00000000

(a)



ID	Sym	Atm. Num	X/Angstrom	Y/Angstrom	Z/Angstrom
Selected Atom No.1:	7	Li 3	+0.00000000	+0.00000000	+5.002000265
Selected Atom No.2:	12	Li 3	+5.002000265	+0.00000000	+0.00000000

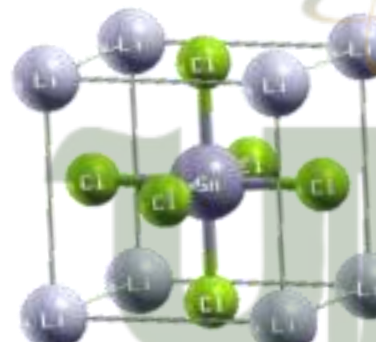
(b)



5. LiSnCl₃

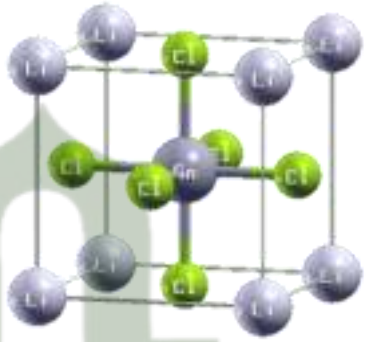
ID	Sym	Atm. Num	X/Angstrom	Y/Angstrom	Z/Angstrom
Selected Atom No.1:	7	Li 3	+0.00000000	+0.00000000	+5.00000000
Selected Atom No.2:	12	Li 3	+5.00000000	+0.00000000	+0.00000000

(a)



ID	Sym	Atm. Num	X/Angstrom	Y/Angstrom	Z/Angstrom
Selected Atom No.1:	7	Li 3	+0.00000000	+0.00000000	+5.523147020
Selected Atom No.2:	12	Li 3	+5.523147020	+0.00000000	+0.00000000

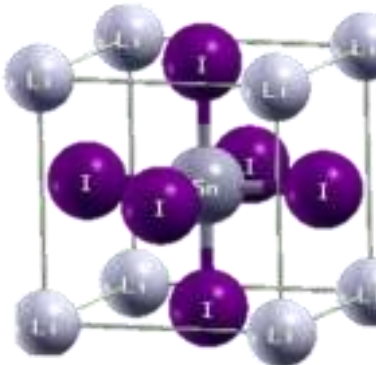
(b)



6. LiSnI₃

ID	Sym	Atm. Num	X/Angstrom	Y/Angstrom	Z/Angstrom
Selected Atom No.1:	7	Li 3	+0.00000000	+0.00000000	+5.00000000
Selected Atom No.2:	12	Li 3	+5.00000000	+0.00000000	+0.00000000

(a)



ID	Sym	Atm. Num	X/Angstrom	Y/Angstrom	Z/Angstrom
Selected Atom No.1:	7	Li 3	+0.00000000	+0.00000000	+6.172540685
Selected Atom No.2:	12	Li 3	+6.172540685	+0.00000000	+0.00000000

(b)



Gambar 4.1 Konstanta Kisi LiPbBr₃, LiPbCl₃, LiPbI₃, LiSnBr₃, LiSnCl₃, dan LiSnI₃ (a) Input awal dan (b) setelah perhitungan *Vc-Relax*

Pada Tabel 4.1, konstanta kisi awalnya adalah 5 Å. Setelah dilakukan perhitungan *vc-relax*, konstanta kisi akan meningkat hingga mendapatkan konstanta kisi optimum. Karena saat nilai konstanta kisi optimum dimasukkan ke dalam file input selanjutnya, nilai energi total tidak berubah. Berikut adalah tabel perhitungan *vc-relax* yang dapat dilihat dibawah ini:

Tabel 4.3 Hasil Perhitungan Konstanta Kisi LiPbBr₃, LiPbCl₃, LiPbI₃, LiSnBr₃, LiSnCl₃, dan LiSnI₃

<i>Perovskite</i>	a (Å)	a relaksasi (Å)	Etot (Ry)
LiPbBr ₃	5	5,93633	-232,02435643
	5,93633	5,9374468	-231,02435842
	5,9374468	5,938097271	-231,02435895
	5,938097271	5,938097271	-231,02435896
LiPbCl ₃	5	5,66261565	-241,38321330
	5,66261565	5,66261565	-241,38321314
LiPbI ₃	5	6,318017795	-220,17100591
	6,318017795	6,320719764	-220,17101456
	6,320719764	6,320719764	-220,17101310
LiSnBr ₃	5	5,802860265	-88,68226622
	5,802860265	5,802860265	-88,68226595
LiSnCl ₃	5	5,52314702	-98,04223219
	5,52314702	5,52314702	-98,04223205
LiSnI ₃	5	6,172540685	-76,83039791
	6,172540685	6,17402668	-76,83040165
	6,17402668	6,1752595353	-76,83040409
	6,1752595353	6,1752595353	-76,83040409

Maka dari tabel diatas konstanta kisi yang digunakan untuk LiPbBr₃ adalah 5,938 Å, LiPbCl₃ adalah 5,662 Å, LiPbI₃ adalah 6,321 Å, LiSnBr₃ adalah 5,802 Å, LiSnCl₃ adalah 5,523 Å, dan LiSnI₃ adalah 6,175 Å. Berikut tabel adalah perbandingan antara konstanta kisi penelitian dengan konstanta kisi referensi:

Tabel 4.4 Perbandingan Konstanta Kisi

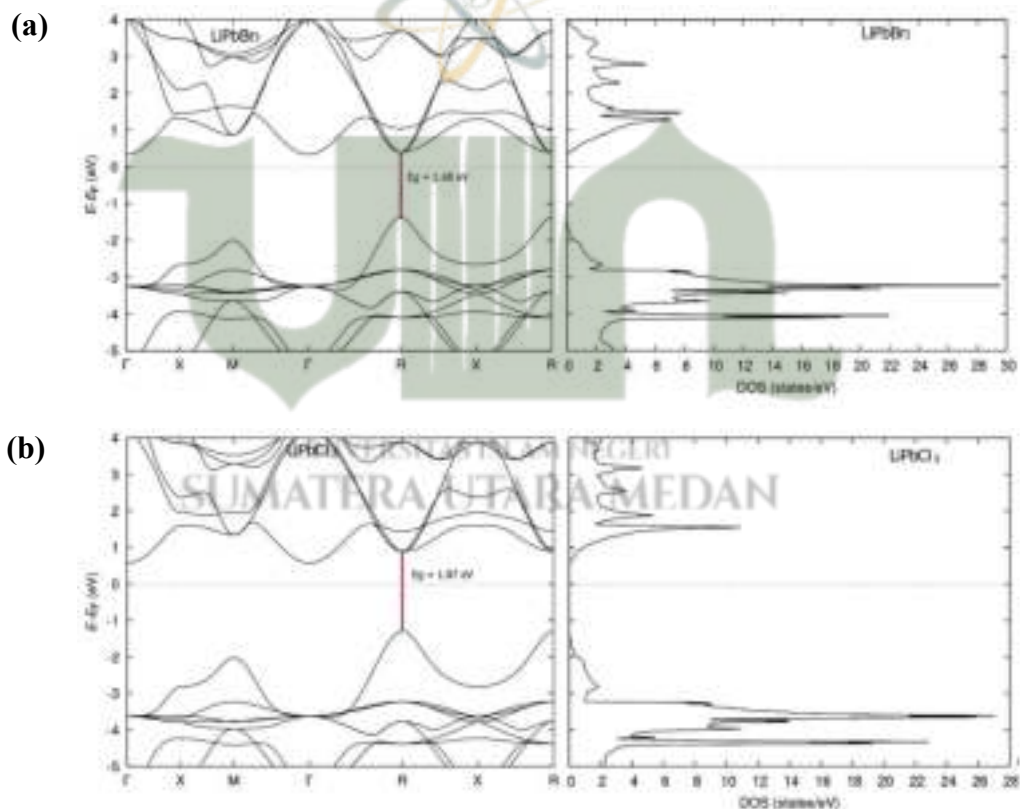
<i>Perovskite</i>	Konstanta Kisi Perhitungan (Å)	Konstanta Kisi Referensi (Pitriana, 2019) (Å)	Persentase Galat (%)
LiPbBr ₃	5,938	5,928	0,168
LiPbI ₃	6,321	6,321	0
LiSnI ₃	6,175	6,158	0,276

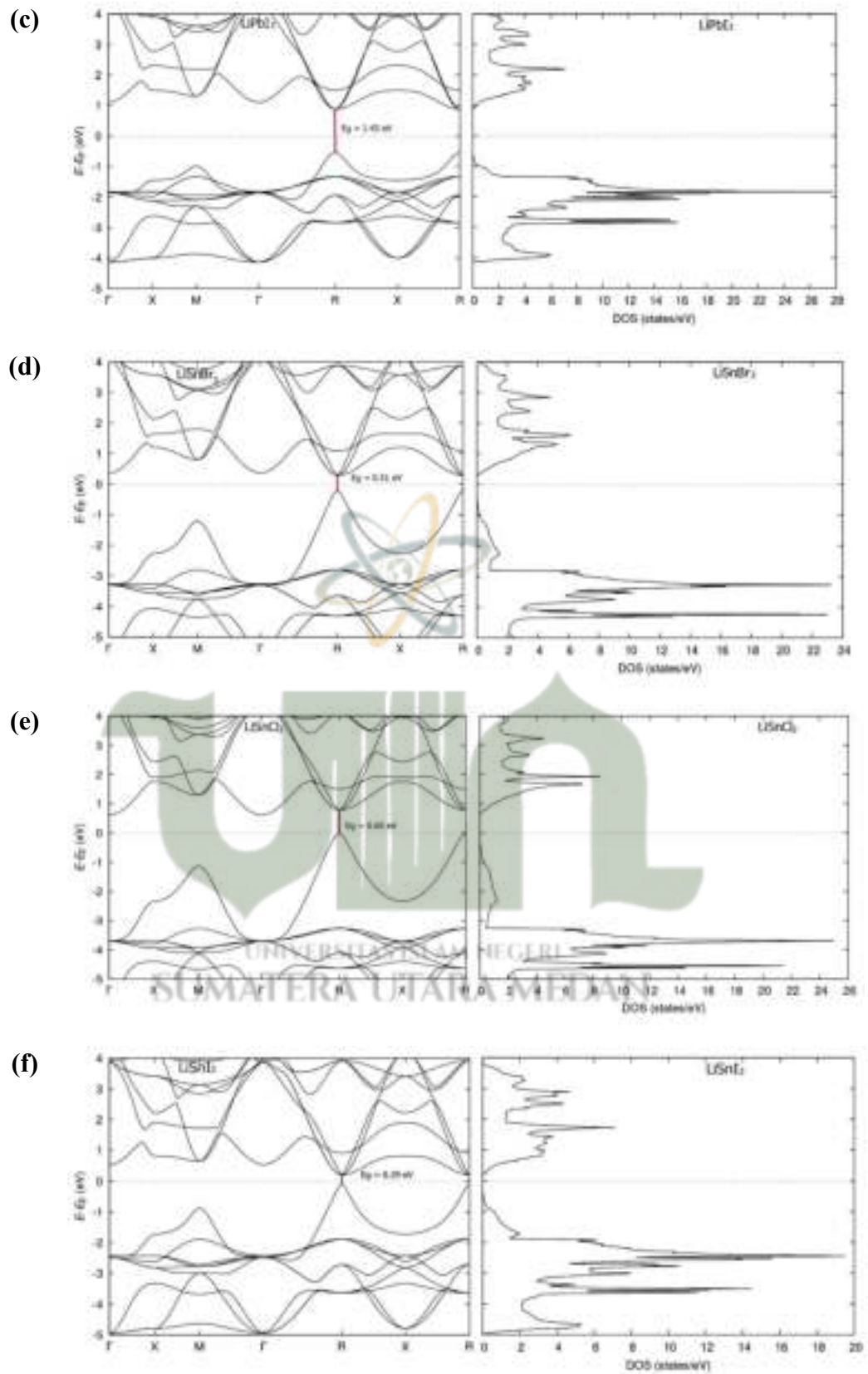
Dari tabel diatas dapat disimpulkan bahwa konstanta kisi secara perhitungan dengan konstanta kisi referensi memiliki nilai yang tidak jauh berbeda dan dapat dilihat dari hasil persentase galatnya yang kecil.

4.1.4 Struktur Elektronik

4.1.4.1 Hasil *Band Structure* dan *Density of States* (DOS)

Berikut adalah gambar dari *Band Structure* dan *Density of States* (DOS) untuk LiPbBr₃, LiPbCl₃, LiPbI₃, LiSnBr₃, LiSnCl₃, dan LiSnI₃:





Gambar 4.2 Hasil *Band Structure* dan *Density of States* (DOS) (a) LiPbBr_3 , (b) LiPbCl_3 , (c) LiPbI_3 , (d) LiSnBr_3 , (e) LiSnCl_3 , dan (f) LiSnI_3

Dari struktur pita elektronik yang ditunjukkan pada Gambar 4.2 bagian kiri menunjukkan struktur pita elektronik sedangkan bagian kanan menunjukkan *Density of States*. Struktur pita elektronik menggambarkan bagaimana energi elektron dalam material bergantung pada bilangan gelombang k , menunjukkan rentang energi yang diizinkan dan tidak diizinkan bagi elektron. *Density of States* (DOS) adalah fungsi yang menunjukkan jumlah keadaan elektron yang tersedia pada setiap tingkat energi. Kesesuaian antara struktur pita elektronik dan DOS terlihat dari bagaimana pita konduksi dan pita valensi pada grafik struktur pita elektronik berkorelasi dengan puncak atau peningkatan dalam DOS, menunjukkan banyaknya tingkat energi yang bisa ditempati oleh elektron. Sebaliknya, gap energi pada struktur pita elektronik tercermin dalam DOS sebagai daerah dengan nilai nol atau sangat rendah, menunjukkan tidak adanya keadaan yang bisa ditempati oleh elektron.

Pita valensi merupakan pita yang terisi penuh dengan elektron. Pada Gambar 4.2 pita valensi berada dibawah energi Fermi (E_F), sedangkan pita konduksi berada diatas E_F . Selisih energi dari pita struktur elektronik dengan E_F ($E - E_F$) menyebabkan energi fermi (E_F) berada di nilai 0. Berikut adalah tabel hasil dari nilai celah pita energi yang dapat dilihat dibawah ini:

Tabel 4.5 Nilai Celah Pita Energi

<i>Perovskite</i>	Eg Penelitian (eV)
LiPbBr ₃	1,71
LiPbCl ₃	1,87
LiPbI ₃	1,43
LiSnBr ₃	0,51
LiSnCl ₃	0,65
LiSnI ₃	0,29

Dan dapat disimpulkan dari penelitian yang telah dilakukan pada grafik struktur pita elektronik dengan DOS menyatakan nilai celah pita energi semakin besar (0.28 eV-1.87 eV) dengan perubahan jari-jari atom yang semakin besar dari Sn ke Pb dan nilai celah pita energi semakin kecil (1,87 eV-1,43 eV dan 0,65 eV-0,28 eV) dengan perubahan jari-jari yang semakin besar dari Cl, Br ke I. Merujuk pada batas Shockley-Queisser (Shockley & Queisser, 1961) bahan yang digunakan sebagai bahan penyerapan cahaya yang efektif dengan tingkat efisiensi konversi daya PCE hingga 35% bisa dicapai oleh divais sel surya sambungan p-n dengan

besar celah pita energi sebesar 1,34 eV, maka *perovskite* LiPbX_3 (LiPbBr_3 , LiPbCl_3 , dan LiPbI_3) berpotensi menjadi bahan penyerapan cahaya dengan efisiensi konversi energi yang besar. Berikut adalah perbandingan antara celah pita energi perhitungan dengan celah pita energi referensi:

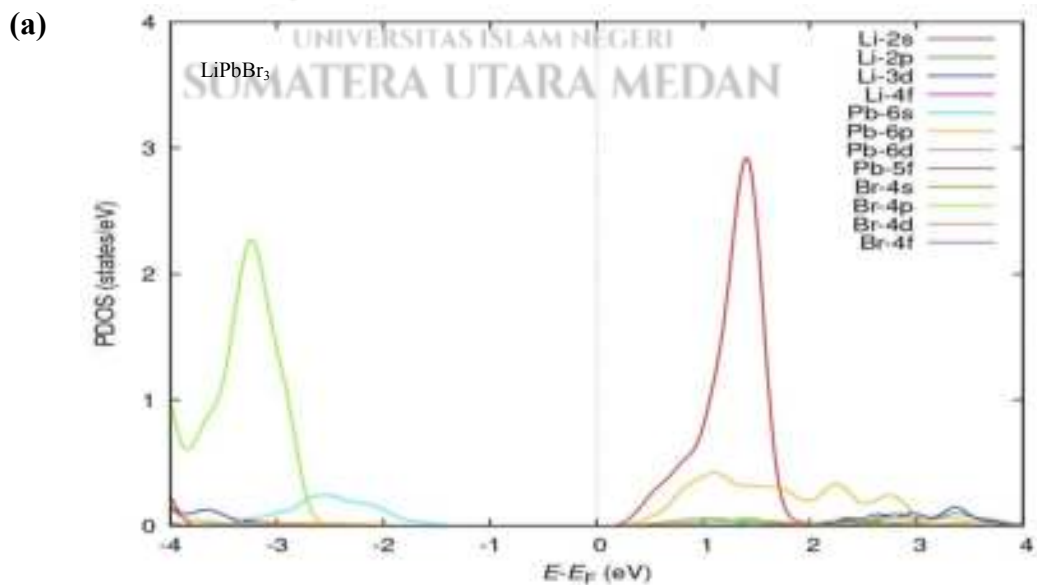
Tabel 4.6 Perbandingan Celah Pita Energi

<i>Perovskite</i>	Eg Perhitungan (eV)	Eg Referensi (Pitriana, 2019) (eV)	Persentase Galat (%)
LiPbBr_3	1,71	1,708	0,117
LiPbI_3	1,43	1,400	2,142
LiSnI_3	0,29	0,287	1,045

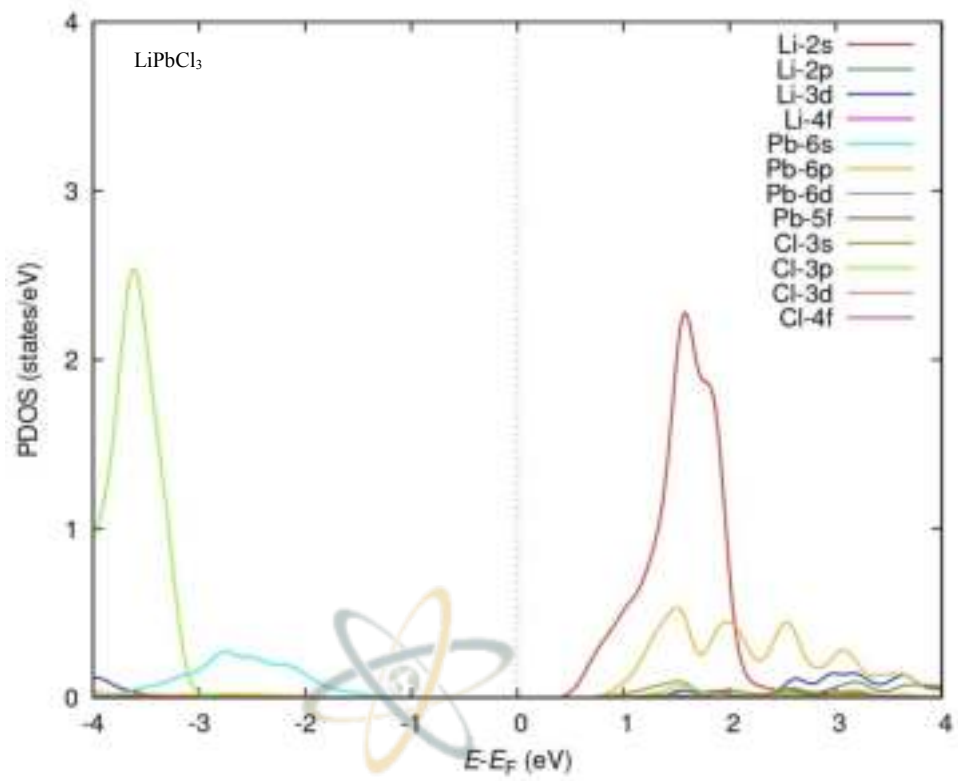
Dari tabel diatas jika dibandingkan dengan penelitian terdahulu (Pina Pitriana, 2019) yang berjudul *Kajian Pengaruh Kation dan Anion Penyusun dari Bahan Perovskit Berbasis Logam Halida pada Struktur Elektroniknya Melalui Perhitungan dengan Metode Density Functional Theory*, dapat disimpulkan bahwa nilai celah pita energi (Eg) secara perhitungan dengan nilai celah pita energi (Eg) referensi memiliki nilai yang tidak jauh berbeda dan dapat dilihat dari hasil persentase galatnya yang kecil.

4.1.4.2 Hasil *Projected Density of States* (PDOS)

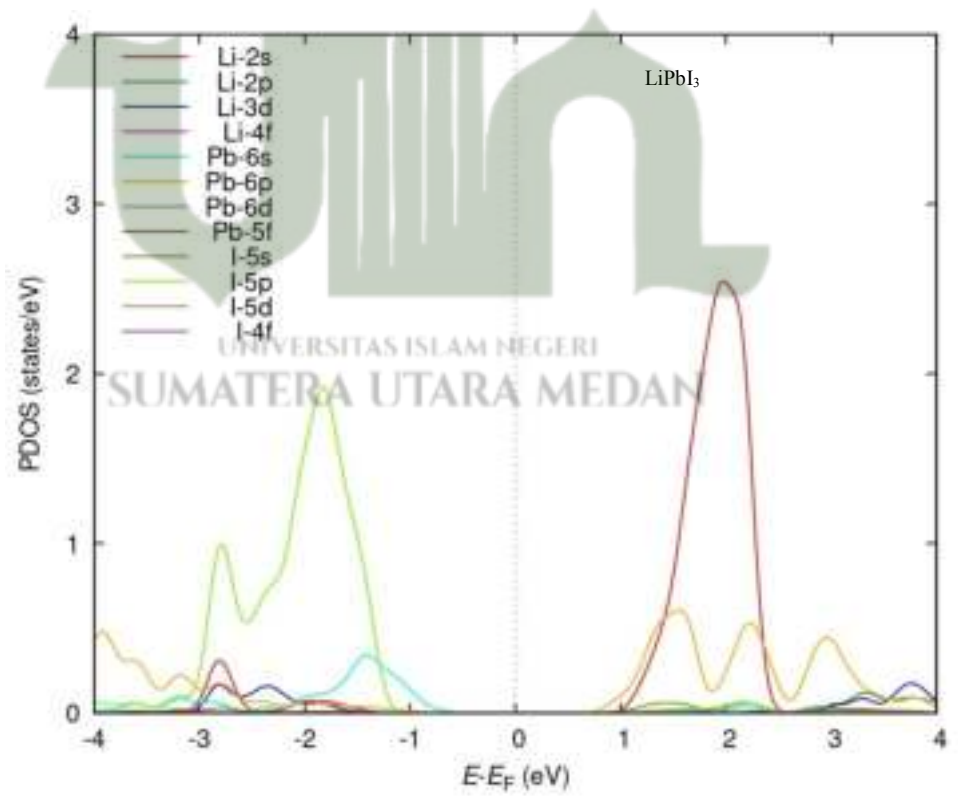
Berikut adalah gambar dari *Projected Density of States* (PDOS) untuk LiPbBr_3 , LiPbCl_3 , LiPbI_3 , LiSnBr_3 , LiSnCl_3 , dan LiSnI_3 :



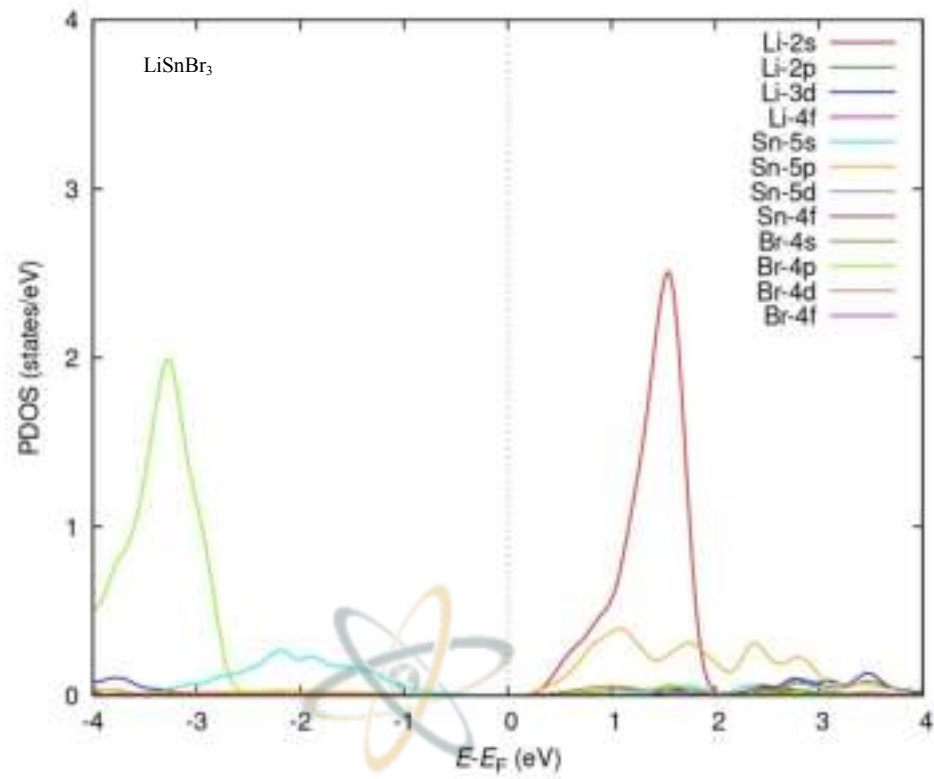
(b)



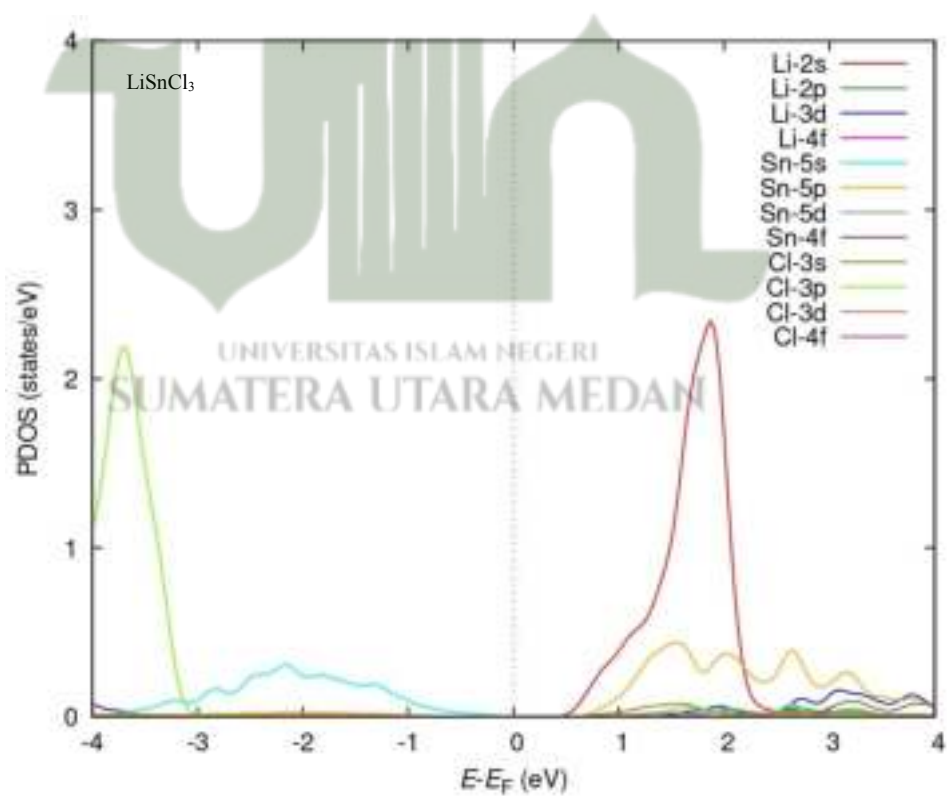
(c)

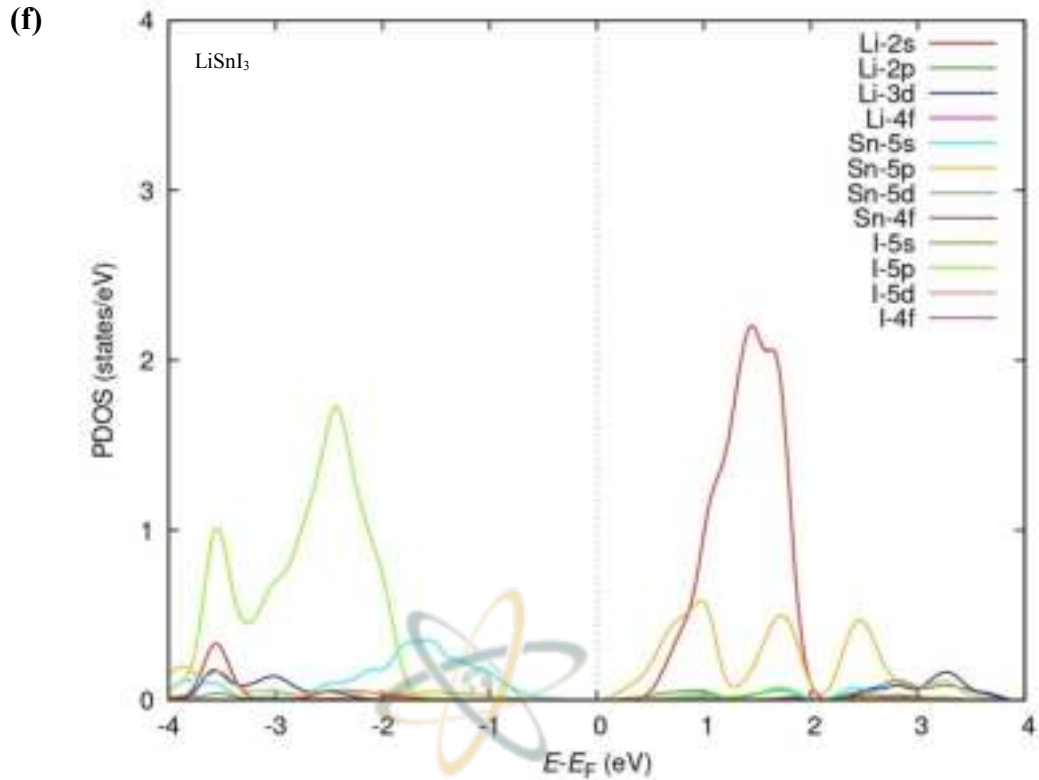


(d)



(e)





Gambar 4.3 Hasil *Projected Density of States* (PDOS) (a) LiPbBr_3 , (b) LiPbCl_3 , (c) LiPbI_3 , (d) LiSnBr_3 , (e) LiSnCl_3 , dan (f) LiSnI_3

Kurva DOS pada Gambar 4.2 di sebelah kanan menunjukkan kerapatan total elektron tanpa memberikan informasi tentang jenis elektron yang berperan dalam pembentukan state tersebut. Untuk mendapatkan informasi tersebut, dilakukan perhitungan PDOS. Kurva PDOS untuk LiPbBr_3 fase kubik terdiri dari orbital Li_{2s} , Li_{2p} , Li_{3d} , Li_{4f} , Pb_{6s} , Pb_{6p} , Pb_{6d} , Pb_{5f} , Br_{4s} , Br_{4p} , Br_{4d} , dan Br_{4f} . Dari semua orbital tersebut, pita valensi dominan terisi oleh orbital Br_{4p} dan Pb_{6s} , sementara pita konduksi dominan terisi oleh Li_{2s} dan Pb_{6p} . Untuk LiPbCl_3 fase kubik terdiri dari orbital Li_{2s} , Li_{2p} , Li_{3d} , Li_{4f} , Pb_{6s} , Pb_{6p} , Pb_{6d} , Pb_{5f} , Cl_{3s} , Cl_{3p} , Cl_{3d} , dan Cl_{4f} . Dari semua orbital tersebut, pita valensi dominan terisi oleh orbital Cl_{3p} dan Pb_{6s} , sementara pita konduksi dominan terisi oleh Li_{2s} dan Pb_{6p} . Untuk LiPbI_3 fase kubik terdiri dari orbital Li_{2s} , Li_{2p} , Li_{3d} , Li_{4f} , Pb_{6s} , Pb_{6p} , Pb_{6d} , Pb_{5f} , I_{5s} , I_{5p} , I_{5d} , dan I_{4f} . Dari semua orbital tersebut, pita valensi dominan terisi oleh orbital I_{5p} , dan Pb_{6s} , sementara pita konduksi dominan terisi oleh Li_{2s} dan Pb_{6p} . Kurva PDOS untuk LiSnBr_3 fase kubik terdiri dari orbital Li_{2s} , Li_{2p} , Li_{3d} , Li_{4f} , Sn_{5s} , Sn_{5p} , Sn_{5d} , Sn_{4f} , Br_{4s} , Br_{4p} , Br_{4d} , dan Br_{4f} . Dari semua orbital tersebut, pita valensi dominan terisi oleh orbital Br_{4p} dan Sn_{5s} , sementara pita konduksi dominan terisi oleh Li_{2s} dan Sn_{5p} .

Untuk LiSnCl_3 fase kubik terdiri dari orbital Li_{2s} , Li_{2p} , Li_{3d} , Li_{4f} , Sn_{5s} , Sn_{5p} , Sn_{5d} , Sn_{4f} , Cl_{3s} , Cl_{3p} , Cl_{3d} , dan Cl_{4f} . Dari semua orbital tersebut, pita valensi dominan terisi oleh orbital Cl_{3p} dan Sn_{5s} , sementara pita konduksi dominan terisi oleh Li_{2s} dan Sn_{5p} . Untuk LiSnI_3 fase kubik terdiri dari orbital Li_{2s} , Li_{2p} , Li_{3d} , Li_{4f} , Sn_{5s} , Sn_{5p} , Sn_{5d} , Sn_{4f} , I_{5s} , I_{5p} , I_{5d} , dan I_{4f} . Dari semua orbital tersebut, pita valensi dominan terisi oleh orbital I_{5p} , dan Sn_{5s} , sementara pita konduksi dominan terisi oleh Li_{2s} dan Sn_{5p} . Dapat disimpulkan bahwa antara atom A, B, dan X, semua ikut berperan dalam pembentukan celah pita energi. Dimana atom A sebagai pembentuk pita konduksi dan X sebagai pembentuk pita valensi, dan atom A dan X mendominasi dalam pembentukan celah pita energi sedangkan atom B juga ikut berperan dalam membentuk pita valensi dan pita konduksi tetapi hanya memberi pengaruh yang lebih kecil, hal ini dimungkinkan posisi atom B yang berada di pusat kubus sehingga tidak merubah secara signifikan simetri dari kristal.

